第一章 数值分析与科学计算引论

记 x^* 为准确值， x 为 x^* 的一个近似值

绝对误差 $e_p = |x - x^*|$ **相对误差** $e_r = \left|\frac{x - x^*}{x}\right|$

相对误差限 $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|x|} \geqslant \frac{|x - x^*|}{|x|} = |e * \mathrm{r}|$

条件数 $C_p = \left|\frac{f(x) - f(\tilde{x})}{f(x)}\right| / \left|\frac{\Delta x}{x}\right| \approx \left|\frac{x f'(x)}{f(x)}\right|$

$C_p \geqslant 10$ 就认为问题是病态的

四则运算误差限

$\varepsilon(\hat{p_1} + \hat{p_2}) <= \varepsilon(\hat{p_1}) + \varepsilon(\hat{p_2})$

$\varepsilon(\hat{p_1}\hat{p_2}) \approx |\hat{p_1}|\varepsilon(\hat{p_2}) + |\hat{p_2}|\varepsilon(\hat{p_1})$

$\varepsilon\left(\frac{\hat{p_1}}{\hat{p_2}}\right) \approx \frac{|\hat{p_1}|\varepsilon(\hat{p_2}) + |\hat{p_2}|\varepsilon(\hat{p_1})}{|\hat{p_2}|^2}$

函数误差限 $\varepsilon(f(\hat{p})) \approx |f'(\hat{p})|\varepsilon(\hat{p})$

若近似数有 n 位有效数字，则可以写为 $\hat{p} = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \ldots + a_i \times 10^{-(n-1)})$

其绝对误差限为 $|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$

其相对误差限 $\left|\frac{x - x^*}{x}\right| \leqslant \varepsilon_r \leqslant \frac{10^{1-n}}{2a_1}$

秦九韶算法

$p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n = (\cdots(a_0x + a_1)x + \cdots + a_{n-1})x + a_n \quad a_0 \neq 0$

$\begin{cases} b_0 = a_0, \\ b_i = b_{i-1}x^* + a_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \end{cases}$

$b_n = p(x^*)$ 为所求

第二章 插值

多项式插值： $P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$

其系数由以下线性方程组确定：

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix}$$

x_i 互异 $\Rightarrow \det \boldsymbol{A} \neq 0 \Rightarrow$ 线性方程解唯一 $\Rightarrow P(x)$ 存在则唯一

拉格朗日插值： $L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)$

其中 $l_k(x) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}$

$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$

$\omega'_{n+1}(x_k) = (x_k - x_0)(x_k - x_1)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)$

余项： $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \xi \in (a, b)$

截断误差限： $|R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$, 其中 $M_{n+1} = \max_{a \leq x \leq b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$

一阶均差： $f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$

二阶均差： $f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$

k 阶均差： $f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \frac{f[x_1, x_2, \ldots, x_k] - f[x_0, \ldots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}$

$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \sum_{j=0}^{k} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_k)}$

$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \xi \in [a, b]$

牛顿插值公式： $N_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)\ldots(x - x_{n-1})$

其中 $a_i = f[x_0, x_1, \ldots, x_i]$

余项： $R_n(x) = f[x, x_0, \ldots, x_n] \cdot (x - x_0) \cdots (x - x_n)$

重节点均差： $f[x_0, x_0] = \lim_{x_1 \to x_0} [x_0, x_1] = f'(x_0)$

n 阶重节点均差： $f[x_0, x_0, \ldots, x_0] = \lim_{x_i \to x_0} f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)$

泰勒插值多项式： $P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$

余项： $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}, \xi \in (a, b)$，也与之前余项在 $x_i \to x_0$ 时的结果一致。

三次埃尔米特插值多项式：

已知 $f(x_0), f(x_1), f(x_2), f'(x_1)$

则 $P(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1] \cdot (x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2] \cdot (x - x_0)(x - x_1) + A(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$

其中 $A = \frac{f'(x_1) - f[x_0, x_1] - (x_1 - x_0)f[x_0, x_1, x_2]}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$

余项： $R(x) = \frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2)$，$\xi$ 在 x_0, x_1, x_2 限定的范围内

两点三次埃尔米特插值多项式

已知 $f(x_0), f(x_1), f'(x_0), f'(x_1)$

则 $P(x) = \left(1 + 2\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 f(x_0) + \left(1 + 2\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2 f(x_1) + (x - x_0)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2 f'(x_0) + (x - x_1)\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2 f'(x_1)$

余项： $R(x) = \frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x - x_0)^2(x - x_1)^2, \xi \in (x_0, x_1)$

分段线性插值： $I_h(x) = \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}}f(x_k) + \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}f(x_{k+1})$, 其中 $x_k \leqslant x \leqslant x_{k+1}, k = 0, 1, \ldots, n-1$

三次样条插值函数： $S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i, x \in [x_i, x_{i+1}]$

记 h 为小区间长度， $M_i = S''(x_i), y_i = f(x_i)$ ，在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上的 $S(x)$ 为

$a_i = \frac{M_{i+1} - M_i}{6h}$ ， $b_i = \frac{M_i}{2}$

$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{(M_{i+1} + 2M_i)h}{6}$ ， $d_i = y_i$

其中 M_i 根据条件解线性方程组得到： $M_i + 4M_{i+1} + M_{i+2} = \frac{6(y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2})}{h^2}, 1 \leqslant i \leqslant n-2$

第三章 逼近与拟合

范数：设 S 是实数域上的线性空间， $x \in S$ ，如果存在值域为实数域的函数 $\|\cdot\|$ ，满足：

正定性： $\|x\| \geqslant 0$ ； $\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$

齐次性： $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|, \alpha \in R$

三角不等式： $\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|, x, y \in S$

就称 $\|\cdot\|$ 是线性空间 S 上的范数， S 与 $\|\cdot\|$ 一起称为**赋范线性空间**，记为 X

对于 R^n 上的向量 $\mathbf{x} = (x_1, \cdots, x_n)^T$ ，三种常用范数：

无穷范数 $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} |x_i|$

1-范数 $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ **2-范数**： $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$

内积：设 X 是数域 K 上的线性空间， $\forall u, v \in X$ 。有 K 中的一个数与其对应，记为 (u, v) ，其满足：

$(u, v) = \overline{(v, u)}$

$(\alpha u, v) = \alpha(u, v), \forall \alpha \in K$

$(u + v, w) = (u, w) + (v, w), \forall w \in X$

$(u, u) \geqslant 0$ ； $(u, u) = 0$ 当且仅当 $u = 0$

则称 (u, v) 是 X 上 u, v 的内积。定义了内积的线性空间称为**内积空间**

带权内积： $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n} \rho_i x_i y_i, \rho_i > 0$

带权范数： $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \rho_i x_i^2}, \rho_i > 0$

函数内积： $(f, g) = \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx$

函数范数： $\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x)f^2(x)dx}$

若 X 是一个内积空间， $u_i \in X$ ，称**Gram 矩阵**为：

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \cdots & (u_n, u_1) \\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \cdots & (u_n, u_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \cdots & (u_n, u_n) \end{bmatrix}$$

Gram 矩阵非奇异的充要条件是 $u_1, u_2, \ldots, u_n$ 线性无关

最佳平方逼近函数： $S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \phi_j(x)$

$\phi = span\{\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots, \phi_n(x)\}$ 是 $C[a, b]$ 中的一个子集

系数由称为**法方程**的线性方程组确定：

$$\begin{bmatrix} (\phi_0, \phi_0) & (\phi_0, \phi_1) & \ldots & (\phi_0, \phi_n) \\ (\phi_1, \phi_0) & (\phi_1, \phi_1) & \ldots & (\phi_1, \phi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\phi_n, \phi_0) & (\phi_n, \phi_1) & \ldots & (\phi_n, \phi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \phi_0) \\ (f, \phi_1) \\ (f, \phi_2) \\ \vdots \\ (f, \phi_n) \end{bmatrix}$$

误差： $(\|\delta(x)\|_2)^2 = (f(x), f(x)) - (S^*(x), f(x)) = (\|f(x)\|_2)^2 - \sum_{k=0}^{n} a_k^*(\phi_k(x), f(x))$

特别地，如果 $\phi_k(x) = x^k, \rho(x) \equiv 1, f(x) \in C[0, 1]$ ，记 $(f(x), \phi_k(x)) = \int_0^1 f(x)x^k dx = d_k, \mathbf{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_n)^T, \mathbf{d} = (d_0, d_m, \ldots, d_n)^T$ ，则法方程可以写为 $\mathbf{Ha} = \mathbf{d}$ 。

其中 $\mathbf{H}$ 是**Hilbert 矩阵**：

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix}$$

Harr 条件：设 $\phi_0(x), \ldots, \phi_n(x) \in C[a, b]$ 的任意线性组合在点集 $x_0, \ldots, x_m, m \geqslant n$ 上至多只有 n 个不同的零点。则称 $\phi_0(x), \ldots, \phi_n(x)$ 在这个点集上满足 Haar 条件。

最小二乘函数： $s^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \phi_j(x)$

取 $\phi_k(x) = x^k$ ，满足 Haar 条件，对应法方程的系数矩阵非奇异，解存在。系数 a_k 可由下面的法方程解出：

$$\begin{bmatrix} \sum \rho_i & \sum \rho_i x_i & \ldots & \sum \rho_i x_i^n \\ \sum \rho_i x_i & \sum \rho_i x_i^2 & \ldots & \sum \rho_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum \rho_i x_i^n & \sum \rho_i x_{n+1} & \ldots & \sum \rho_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \rho_i y_i \\ \sum \rho_i x_i y_i \\ \sum \rho_i x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum \rho_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

误差： $(\|\delta\|_2)^2 = \sum_{i=0}^{m} \rho(x_i)[s^*(x_i) - f(x_i)]^2$

施密特（Schmite）正交化过程：若 $f_0(x), f_1(x), \ldots, f_n(x)$ 为 $C[a, b]$ 上的一组线性无关函数，则由它们可以得到 $C[a, b]$ 上一组两两**正交**的函数 $g_n(x) = f_n(x) - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(f_n, g_i)}{(g_i, g_i)} g_i(x)$

规范正交组： $e_k(x) = \frac{1}{\|g_k\|_2} g_k(x)$

正交多项式：多项式空间 P_n 中一组线性无关函数 $\{x^k\}$ 经过施密特正交化过程得到的一组多项式 $\{p_i(x)\}$

若 $\{p_i(x)\}$ 是 $[a, b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的正交多项式，则它们具有以下性质：

$p_k(x)$ 是首项系数不为 0 的 k 次多项式

$\{p_i(x)\}$ 是多项式空间 P_n 上的一组正交基

$p_n(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 上有 n 个单根

$p_n(x)$ 与任一不高于 $n-1$ 次的多项式正交

下面给出由不同的权函数，得到的不同正交多项式：

Legendre 多项式，$t \in [-1, 1]$，$\rho(t) = 1$

$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = t, \quad (k+1)P_{k+1}(t) = (2k+1)tP_k(t) - kP_{k-1}(t)$

Chebyshev 多项式1，$t \in [-1, 1]$，$\rho(t) = \frac{1}{\sqrt{1 - t^2}}$

$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = t, \quad P_{k+1}(t) = 2tP_k(t) - P_{k-1}(t)$

Chebyshev 多项式2，$t \in [-1, 1]$，$\rho(t) = \sqrt{1 - t^2}$

$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = 2t, \quad P_{k+1}(t) = 2tP_k(t) - P_{k-1}(t)$

Laguerre 多项式，$t \in [0, \infty)$，$\rho(t) = e^{-t}$

$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = 1 - t, \quad P_{k+1}(t) = (2k + 1 - t)P_k(t) - k^2 P_{k-1}(t)$

Hermite 多项式，$t \in (-\infty, \infty)$，$\rho(t) = e^{-t^2}$

$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = 2t, \quad P_{k+1}(t) = 2tP_k(t) - 2kP_{k-1}(t)$

如果拟合的时候，用的是正交多项式 $\{p_i(x)\}$ ，可以直接写出最佳平方逼近函数 $S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(f, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k(x)$，注意此时的积分区域为定义域，非定义域需做出相应变换

对于一般的积分，有： $\int_a^b P(s)ds = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} P(t)dt,\ s = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$

对于 Legendre 多项式，有： $\int_{-1}^{1} P_j(t)P_k(t)dt = \frac{2}{2k+1},\ j = k$

第四章 数值积分微分

数值积分

左矩形公式 $I \approx (b-a)f(a)$ **右矩形公式** $I \approx (b-a)f(b)$

中点矩形公式 $I \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

插值型求积公式 $I \approx I_n = \int_a^b L_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$, 其中 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

余项 $R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$ ，至少有n次代数精度

形如 $I_n = \sum^n A_k f(x_k)$ 的积分公式至少有 n 次代数精度的充要条件是：它是插值型的

牛顿-柯特斯公式: $I \approx I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} \mathbf{C}_k^{(n)} f(x_k)$

其中 $h = \frac{b-a}{n}, x_k = a + kh$

若n为偶数，则n阶N-C公式至少有n+1次代数精度

柯特斯系数： $\mathbf{C}_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)! \cdot n}\int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^{n} (t - j)dt$

$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$ 恒成立

梯形公式 $I_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$ 余项 $R[f] = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

辛普森公式 $I_2 = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$

余项 $R[f] = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$

柯特斯公式 $I_4 = \frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$ 误差 $R[f] = -\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta), \eta \in (a, b)$

复化的梯形公式 $I \approx T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$

余项： $R_n[f] = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \eta \in (a, b)$

复化的辛普森公式 $I \approx S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)], x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}$

余项： $R_n[f] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \eta \in (a, b)$

递推型梯形公式 $T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$

进一步可定义 $S_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{4 - 1}, C_n = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1}$

龙贝格求积公式 $R_n = \frac{4^3 C_{2n} - C_n}{4^3 - 1}$

有 $\lim_{n \to \infty} T_n, S_n, C_n, R_n = I$，收敛速度从左到右依次加快

高斯-勒让德求积公式 $\int_{-1}^{1} 1 * f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$. 其中 x_k 为勒让德多项式的零点

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
1	0.000000	2.000000	5	$\pm$0.9061798	0.2369269
2	$\pm$0.5773503	1.000000		$\pm$0.5384693	0.4786287
3	$\pm$0.7745967	0.5555556		0.000000	0.5688889
	0.000000	0.8888889	6	$\pm$0.9324695	0.1713245
4	$\pm$0.8611363	0.3478548		$\pm$0.6612094	0.3607616
	$\pm$0.3399810	0.6521452		$\pm$0.2386192	0.4679139

余项为 $R[f] = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)} f^{(2n)}(\eta)$, $\eta \in (-1, 1)$

高斯-拉盖尔求积公式 $\int_0^{\infty} e^{-x} * f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$. 其中 x_k 为拉盖尔多项式的零点

n	x_k	A_k
2	0.5858864376	0.8535533905
	3.4142135623	0.1464466094
3	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	602899450829	0.0103892565
4	0.3225476896	0.6031541043
	1.7457611011	0.3574186924
	4.5366202969	0.0388879085
	9.3950709123	0.0005392947
5	0.2635603197	0.5217556105
	1.4134030591	0.3986668110
	3.5964257710	0.0759424497
	7.0858100058	0.0036117587

n	x_k	A_k
	12.6408008442	0.0002337000
6	0.2228466041	0.4589646793
	1.1889321016	0.4170008307
	2.9927363260	0.1133733820
	5.7751435691	0.0103991795
	9.8374674183	0.0002610172
	15.9828739806	0.0000089895

高斯-赫尔米特求积公式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} * f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$. 其中 x_k 为赫尔米特多项式的零点

n	x_k	A_k
2	± 0.7071067811	0.8862269254
3	± 1.2247448713	0.2954089751
	0	1.8163590006
4	± 0.5246476232	0.8049140900
	± 1.6506801238	0.0813128354
5	± 0.9585724646	0.3936193231
	± 2.0201828704	0.0199532421
	0	0.9453087204
6	± 0.4360774119	0.7246295952
	± 1.3358490704	0.1570673203
	± 2.3506049736	0.0045300099
7	± 0.8162878828	0.4256072526
	± 1.6735516287	0.0545155828
	± 2.6519613563	0.0009171812
	0	0.8102646175

数值微分

向前差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ 误差：$-\frac{h}{2}f''(\xi)$

向后差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$ 误差：$\frac{h}{2}f''(\xi)$

中心差商公式 $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ 误差：$-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$

舍入误差上界 $\delta(f'(a)) = f'(a) - G(a) \leqslant \frac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h} \leqslant \frac{\varepsilon}{h}$，$\varepsilon = \max\{|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$

其中 $\varepsilon_1,\varepsilon_2$ 分别是 $f(a+h), f(a-h)$ 的舍入误差

插值型求导公式：$f'(x) = L_n'(x)$

余项 $R[f']|_{x=x_k} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$

第六章 线性方程组——迭代法

定常迭代法

对于线性方程组 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$（$\mathbf{A}$ 是非奇异矩阵），对 $\mathbf{A}$ 进行矩阵分裂：

$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}$，其中 $\mathbf{M}$ 是可选择的非奇异矩阵

于是得到迭代式 $\mathbf{x}=\mathbf{M^{-1}Nx}+\mathbf{M^{-1}b}=\mathbf{Bx}+\mathbf{f} \Rightarrow \mathbf{x^{(k+1)}}=\mathbf{Bx^{(k)}}+\mathbf{f}$

一阶线性定常迭代法

即取 $\mathbf{M}=\mathbf{I}$

雅可比迭代法

采用矩阵分裂：$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}=\mathbf{D}-(\mathbf{L}+\mathbf{U})$

其中 $\mathbf{D}$ 就是单独提出 $\mathbf{A}$ 的对角线，$\mathbf{L},\mathbf{U}$ 是 $\mathbf{A}$ 除去对角线后的下三角和上三角取负

则 $\mathbf{x^{(k+1)}}=\mathbf{D^{-1}(L+U)x^{(k)}}+\mathbf{D^{-1}b}=\mathbf{B_Jx}+\mathbf{f}$

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

高斯-赛格尔迭代法

采用矩阵分裂：$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}=(\mathbf{D}-\mathbf{L})-\mathbf{U}$

则 $\mathbf{Dx^{(k+1)}}=\mathbf{Lx^{(k+1)}}+\mathbf{Ux^{(k)}}+\mathbf{b}$

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}\left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i\right)$$

逐次超松弛迭代法（SOR）

引入松弛因子 $\omega, 0<\omega<2$ 采用矩阵分裂：$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}=\frac{1}{\omega}(\mathbf{D}-\omega\mathbf{L}) - \frac{1}{\omega}[(1-\omega)\mathbf{D}+\omega\mathbf{U}]$

则 $\mathbf{Dx^{(k+1)}}=\mathbf{Dx^{(k)}}+\omega(\mathbf{b}+\mathbf{Lx^{(k+1)}}+\mathbf{Ux^{(k)}}-\mathbf{Dx^{(k)}})$

$\mathbf{x^{(k+1)}}=(\mathbf{D}-\omega\mathbf{L})^{-1}\{(1-\omega)\mathbf{D}+\omega\mathbf{U}\}\mathbf{x^{(k)}}+\omega(\mathbf{D}-\omega\mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}$

$\mathbf{x^{(k+1)}}$ 可由以下公式得到：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}$$

严格对角占优矩阵

满足条件 $\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}| < |a_{ii}|$，$i=1,2,\cdots,n$，则称矩阵A是严格对角占优矩阵。

雅可比迭代法和高斯-赛格尔迭代法都收敛

收敛性

迭代法收敛充要条件：$\rho(\mathbf{B})<1$，此时对任意初始向量 $\mathbf{x^{(0)}} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})^T$，会收敛到真实解

用到矩阵分裂时，还要求 $\mathbf{D}$ 非奇异

另一个充分条件：对于迭代法 $\mathbf{x^{(k+1)}}=\mathbf{Bx^{(k)}}+\mathbf{f}$ 如果有 $\mathbf{B}$ 的某种算子范数 $\|\mathbf{B}\|=q<1$，则迭代法全局收敛，且有

$\|x^*-x^{(k)}\| \le q^k\|x^*-x^{(0)}\|$

$\|x^*-x^{(k)}\| \le \frac{q}{1-q}\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\|$

$\|x^*-x^{(k)}\| \le \frac{q^k}{1-q}\|x^{(1)}-x^{(0)}\|$

第五章 线性方程组——直接法

高斯消元法：通过基本变换，将增广矩阵转化为阶梯型矩阵：

$$[\mathbf{A}:\mathbf{b}] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_2^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，则 $x_n = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)}x_j)/(a_{kk}^{(k)})$

LU 分解：(Doolittle)高斯消元法的每一步初等变换相当于一个初等矩阵左乘原矩阵，最终得到一个上三角阵 $\mathbf{L_{n-1}}\ldots\mathbf{L_2L_1A}=\mathbf{U}$

所以 $\mathbf{A}=\mathbf{L_1^{-1}L_2^{-1}}\ldots\mathbf{L_{n-1}^{-1}U}=\mathbf{LU}$，其中 $\mathbf{L}$ 是下三角阵：

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

则原方程组等价于 $\mathbf{Ux}=\mathbf{y}, \mathbf{Ly}=\mathbf{b}$，这个方程组可按下述过程解出：

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k,\ x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k)/(u_{ii})$$

平方根法：设 $\mathbf{A}$ 是对称正定矩阵，则一定有唯一分解 $\mathbf{A}=\mathbf{LU}$，且 $u_{kk}>0$

则有 Cholesky 分解 $\mathbf{A}=\mathbf{LU}=\mathbf{LDL^T}=\mathbf{LD^{1/2}D^{1/2}L^T}=\mathbf{GG^T}$，其中

$$\mathbf{D^{1/2}} = \begin{bmatrix} \sqrt{u_{11}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{u_{22}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{u_{33}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{u_{nn}} \end{bmatrix}$$

Cholesky 分解后，类似 LU 分解的过程得到最终解

矩阵范数：如果矩阵 $\mathbf{A} \in R^{n\times n}$ 与某个非负的实值函数 $N(\mathbf{A})=\|\mathbf{A}\|$ 满足正定性、齐次性、三角不等式以及相容性，则称 $N(\mathbf{A})$ 是一个矩阵范数

相容性：$\|\mathbf{Ax}\| \leqslant \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|$。其中 $\|\mathbf{A}\|$ 矩阵范数，$\|\mathbf{Ax}\|, \|\mathbf{x}\|$ 是向量范数。只有满足这个不等式，才说这个矩阵范数和这个向量范数是相容的。

算子范数（从属矩阵范数）：$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1}\{\|\mathbf{Ax}\|\} = \max_{\mathbf{x}\neq 0}\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$，其中 $\|\mathbf{Ax}\|$ 是某个向量范数。算子范数度量了矩阵 $\mathbf{A}$ 将向量 $\mathbf{x}$ 映射到新向量 $\mathbf{Ax}$ 的"放大"程度。

由不同的向量范数可以导出不同的算子范数：

1-范数：又称列范数，每一列中元素的绝对值之和的最大值 $\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n}\left\{\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|\right\}$

2-范数：又称谱范数 $\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}}$，其中 λ_{max} 是矩阵 $\mathbf{A^TA}$ 最大特征值

无穷范数：又称行范数，每一行中元素的绝对值之和的最大值 $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\left\{\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right\}$

其他种类的范数：**F-范数**：$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^2}$

谱半径 $\rho(\mathbf{A}) = \max|\lambda_i|$，其中 λ_i 是 $\mathbf{A}$ 的特征值

对矩阵的任何一种相容范数都有 $\rho(\mathbf{A}) \leqslant \|\mathbf{A}\|$

第七章 非线性方程组求根

二分法的误差：

$|x_k - x^*| \leqslant (b_k-a_k)/2 = (b-a)/2^{k+1} \quad (k=0,1,2\ldots)$

不动点的存在性

设迭代函数 $\phi(x) \in C[a,b]$，并且

(1) $\forall x \in [a,b]$，都有 $\phi(x) \in [a,b]$

(2) $\exists 0 \le L < 1$，使得 $\forall x,y \in [a,b]$，都有 $|\phi(x)-\phi(y)| \le L|x-y|$

那么 $\phi(x)$ 在 $[a,b]$ 上存在唯一的不动点 x^*

上述定理的第二个条件可用 $|\phi'(x)| \le L < 1$ 代替。

误差估计：

$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$ 或 $|x_k-x^*| \leqslant \frac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}|$

局部收敛性

若 $\phi'(x)$ 在 x^* 的某邻域内连续，且 $|\phi'(x^*)|<1$，则迭代法是局部收敛的.

收敛阶

误差 $e_k = x_k - x^*$，若 $\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p} = C$，$C \neq 0$，则迭代过程 p 阶收敛

如果迭代函数在不动点 x^* 附近有 p 阶连续导数且 $\phi'(x^*) = \phi''(x^*) = \cdots = \phi^{(p-1)}(x^*) = 0$，$\phi^{(p)}(x^*) \neq 0$，那么迭代过程在 x^* 附近 p 阶收敛

斯特芬森迭代法：$x_{k+1} = \psi(x_k), \psi(x) = x - \frac{[\phi(x)-x]^2}{\phi(\phi(x))-2\phi(x)+x}$

牛顿法：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$

简化牛顿法：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$

牛顿下山法：$x_{k+1} = x_k - \lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ 每一次迭代从 $\lambda=1$ 开始试算，不断令 λ 减半直到满足 $|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|$

重根情形下的牛顿法：若 $f(x) = (x-x^*)^m h(x)$ 改为 $x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$，仍然是平方收敛的

令 $\mu(x) = f(x)/f'(x)$ 对其用牛顿法得：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)}$

单点弦截法（割线法）：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_0)}(x_k-x_0)$

两点弦截法：$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k-x_{k-1})$

可取两端点为初始值

第九章 常微分方程

一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x,y), x \in [x_0, b] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

利普希兹条件：$|f(x,y_1) - f(x,y_2)| \leqslant |y_1 - y_2|, L > 0$

前向欧拉法：$y_{n+1} = y_n + hf(x_n,y_n)$，局部截断误差 $T_{n+1} = \frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$

后向欧拉法：$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1},y_{n+1})$，局部截断误差 $T_{n+1} = -\frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$

梯形方法：$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n,y_n) + f(x_{n+1},y_{n+1})]$，局部截断误差 $T_{n+1} = -\frac{h^3}{12}y'''(x_n) + O(h^4)$

改进欧拉法（Heun 法）

$$\begin{cases} y_p = y_n + hf(x_n,y_n) \\ y_c = y_n + hf(x_{n+1},y_p) \\ y_{n+1} = \frac{y_p+y_c}{2} \end{cases}$$

r 级显式龙格-库塔公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\phi(x_n,y_n,h) = y_n + h\sum_{i=1}^{r}c_iK_i \\ K_1 = f(x_n,y_n) \\ K_i = f(x_n+\lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1}\mu_{ij}K_j), \quad i=2,\ldots,r \end{cases}$$

二阶 R-K 公式（中点公式）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n,y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \end{cases}$$

三阶 R-K 公式（库塔公式）

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3), \\ K_1 = f(x_n,y_n) \\ K_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = f(x_n + h, y_n - hK_1 + 2hK_2) \end{cases}$$

四阶 R-K 公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n,y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{cases}$$

线性多步法：$y_{n+k} = \sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i y_{n+i} + h\sum_{i=0}^{k}\beta_i f_{n+i}, f_{n+i} = f(x_{n+i}, y_{n+i})$

$\beta_k \neq 0$ 隐式 k 步法；否则为显示多步法

局部截断误差：$T_{n+k} = c_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2})$

阿当姆斯显式公式

步数 k	阶数 p	公式	c_{p+1}
1	1	$y_{n+1} = y_n + hf_n$	$\frac{1}{2}$
2	2	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n)$	$\frac{5}{12}$
3	3	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{h}{12}(23f_{n+2} - 16f_{n+1} + 5f_n)$	$\frac{3}{8}$
4	4	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{h}{24}(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$	$\frac{251}{720}$

阿当姆斯隐式公式

步数 k	阶数 p	公式	c_{p+1}
1	2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$	$-\frac{1}{12}$
2	3	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{12}(5f_{n+2} + 8f_{n+1} - f_n)$	$-\frac{1}{24}$
3	4	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{h}{24}(9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n)$	$-\frac{19}{720}$
4	5	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{h}{720}(251f_{n+4} + 646f_{n+3} - 264f_{n+2} + 106f_{n+1} - 19f_n)$	$-\frac{3}{160}$

米尔尼方法 $y_{n+4} = y_n + \frac{4h}{3}(2f_{n+3} - f_{n+2} + 2f_{n+1})$

局部截断误差 $T_{n+4} = \frac{14}{45}h^5y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$

辛普森方法 $y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3}(f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2})$.

局部截断误差 $T_{n+2} = -\frac{h^5}{90}y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$.

汉明方法 $y_{n+3} = \frac{1}{8}(9y_{n+2} - y_n) + \frac{3h}{8}(f_{n+3} + 2f_{n+2} - f_{n+1})$

局部截断误差 $T_{n+3} = -\frac{h^5}{40}y^{(5)}(x_n) + O(h^6)$.